入　门　指　南

SciFinder Scholar™ 2006

用于Windows

2005 年8 月

2005 年美国化学学会

版　权　所　有

SciFinder Scholar™ 2006 入门指南

欢迎使用 SciFinder Scholar 2006！本手册为您提供了开始使用 SciFinder Scholar 时需要了解的信息。SciFinder Scholar 是一种桌面研究工具，用来查找和处理广泛的化学及相关学科课题信息。

主题	详细资料可以从以下页面获取
SciFinder Scholar功能	3
SciFinder Scholar内容	4—5
可选功能	6
硬件与软件要求	7—8
启动SciFinder Scholar	9
检索	10
定位	11
浏览	12
SciFinder Scholar帮助和资源	13

SciFinder Scholar 功能

SciFinder Scholar2006 增强组件包括

- 改进的导航功能—高效访问“检索”与“定位”功能
- 结构相似性搜索—在数据库中根据查询的目标结构对所有物质进行比较，并将类似分值最高的结构检索出来
- 新的结构和反应绘图工具：
  不确定位置取代工具—定义取代基团可能在环上的多个位置进行取代
  重复组分工具—定义可变链长度和环大小
- 结构搜索的“Pre- search(预搜索)”过滤器—仅限于：
  特定物质类
  单组分物质
  具有商业来源的物质
  有一个或多个相关参考文献的物质
  特定类型研究
- 在反应结果中突出显示查询结果—在反应结果显示中很容易识别所查询的结构
- 相关信息的新视觉指示器—在单击反应式中任何物质，即可快速检索此物质的制备信息、参考文献、物质详情、商业信息源和法规信息。
- 中间反应步骤显示改进—在单个视图中查看多步反应的所有步骤
- 附加的反应内容
  可以查看从 2003 年到现在所报道反应的反应条件（如时间、温度、压力、pH 值）
  查看与生成物相关的混合比
  查看反应中的全部异构体
- 定位书目信息—使用一条或多条书目信息（如标题文字、作者/发明者、期刊名称、出版日期或专利号）快速查找特定参考文献
- 删除重复文献—快速删除重复CAplus记录的MEDLINE记录，或设置首选项，自动删除重复。

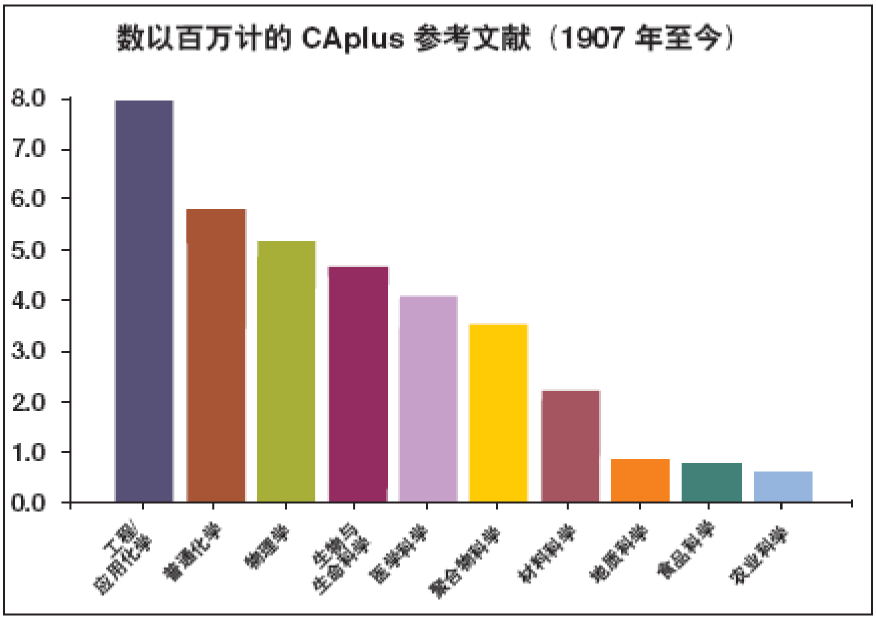
SciFinder Scholar 也包含下列功能：

- 按化学结构（包含亚结构）、反应结构、研究课题、作者姓名、公司或组织名称等进行检索。
- 分类、分析或精化答案集
- 引用检索和链接
- 将物质答案链接至详细的记录、参考文献、3D模型、商业信息源、法规信息和反应
- 保存和打印结果
- 通过ChemPort Connection访问全文
- 浏览科学期刊目录
- 链接至Internet资源

SciFinder Scholar 内容

SciFinder Scholar 能检索化学文摘社（CAS）数据库和美国国家医学图书馆 MEDLINE 数据库所包含的信息。所有记录均以英文表述。

CAplus 数据库包含来自 9500 期刊和 150 个国家的 2500 多万个文档，包括从 1907 年至今的文献和 21600 多条来自 1907 年前的期刊记录。文献来源包括期刊、专利、会议录、论文、技术报告、书籍等。引自 50 多家现行专利发行机构的专利信息。CAplus 囊括了与大量科学信息，包括化学、生物、工程和相关学科。



MEDLINE 数据库涵盖了来自 70 多个国家 4780 多种期刊的生物医药文献。MEDLINE 包括前 OLDMEDLINE 数据库的数据，一共包括了从 1950 年至今的 1500 多万条生物医药引文。MEDLINE 也包括 IN－PROCESS 记录，这些记录是未被完全编入索引并收录于 MEDLINE 的最新文献。

除了庞大的文献来源之外，CAS REGISTRY 数据库可让您访问 2900 多万种有机和无机化合物以及 5700 多万条序列。您可以通过这些记录访问结构图、名称、分子式和属性等。

CASREACT 数据库让您可以访问 1840 年至今的期刊和专利中超过 1100 万条单步或多步化学反应的信息。SciFinder Scholar 能显示化学反应图，包括反应物结构、试剂、产物和反应条件、以及参考信息。

您可以从 CHEMCATS 和 CHEMLIST 数据库中获得许多物质的化学来源和法规信息。将近 900 万种物质的化学来源信息（包括供应商地址和价格信息）来自 900 多个化学品目录和图书馆。从 1979 年至今的 23 万 8 千多条信息记录可让您访问物质标识信息，库存状态，信息来源和达标信息。

有关数据库及其内容的更多信息，请访问CAS网站www.cas.org。

您可以利用 SciFinder Scholar 查找如下信息

- 文献信息

  标题

  作者、发明者

  公司名称、集团资源、专利权人

  出版年份

来源、出版物、日期、出版商、卷号、期号、分页、CODEN、ISSN
专利标识、包括专利、申请、优先权和同族专利信息
摘要
索引
补充条款
引文
文献中所述的物质和反应

- **物质信息**

  化学名称
  CAS 注册号
  分子式
  结构图
  序列信息，包括 GenBank 和专利备注
  属性数据
  来自化学物质供应商目录的商业来源信息
  法规信息
  编辑注释
  物质参考文献
  物质参与的反应
  STN 在线服务中的其它公众可用数据库列表，在此可以查找与物质相关的其它附加信息

- **反应信息**

  化学反应图，包括反应物、试剂、产物、催化剂、溶剂和条件
  反应参考文献
  有关所有反应参与物的附加反应、参考文献、物质详情、商业信息源和法规信息

可选功能

以下内容简要描述了 SciFinder Scholar 的可选功能，关于功能的详细情况，请参阅 SciFinder Scholar 联机帮助。

SciFinder Scholar 亚结构模块

您可以选择购买“SciFinder Scholar 亚结构模块（SSM）”。此模块使您可以：

- 将查询结构作为更复杂结构的亚结构进行查询
- 进行相似性搜索
- 绘制可变基团和R组，即元素周期表的任意元素、常见基团和可变基团。
- 禁止在特定节点和键发生取代和环合成。
- 预览结果以评估答案数目和查看样本答案
- 绘制立体键，并针对指定的立体特征自动分析答案
- 精确分析答案，这是初次搜索的必要步骤
- 根据真实原子结合，可变基团和R基团分析答案
- 通过物质属性数据精化结构检索答案集

3D 结构建模

可以使用Accelrys公司的Discovery Studio Viewer产品（DS ViewPro 或DS ViewerLite）以及SciFinder Scholar 来查看 3D 结构模型。Viewer 产品属于高端分子可视化应用程序，通过他们可以对模型进行调整，以便更好的理解 3D 结构。

硬件与软件要求：

电脑配置： 至少配备奔腾或与其相当的处理器

Microsoft Windows 98，Me，2000，XP，或 NT 4.0；

Windows 95，98，Me 或 NT4.0 需要至少 32MB 内存（RAM），推荐使用 64MB 内存，对于 Windows2000 至少 64MB，XP 至少 128MB 或更高的内存；

至少应具备 70MB 以上的可用硬盘空间，建议 80－85MB 以上（安装至少需要 150M 内存）；

如需安装 Microsoft Internet Explorer 的 SciFinder Scholar 工具栏，需要额外 25MB 的磁盘空间（按装需要 75MB）。（这里假定.NET 软件已经安装）

通过互联网与 CAS 建立 TCP/IP 网络级的连接，需要通过 210 端口与 CAS 建立 Z39.50 应用级别的连接

要通过 ChemPort Connection 访问文本格式全文和 CAS 服务器上的联机帮助文件，需要通过 80 端口建立 HTTP 应用级连接。

显示器： SVGA 彩色显示器；屏幕分辨率至少为 800×600，建议 1024×768 以上，256 色以上；

打印机： 高性能图形打印机，如激光或喷墨打印机（推荐）；

附加软件：

网页浏览器： Microsoft Internet Explorer（IE），4.0 或 Netscape Navigator 或 Communicator 或更高或 Mozilla FireFox，版本 1.0。

通过 ChemPort 与全文链接，或需要在线帮助以及 Tools（工具）菜单中的互联网资源时需要网页浏览器；

必须在 Netscape 和 Firefox 插件及组件文件夹中安装插件，这样才可以使用某些 ChemPort 功能，如参考链接。在 Scifinder Scholar2006 安装过程中该插件可自动安装。

如需使用在线支持和ChemPort的某些功能，必须激活Java™和JavaScript；

使用 ChemPort 参考资源链接，必须启用 MSIE 中的 ActiveX；

使用 ChemPort 的某些功能，还必须设置 Cookies 许可；

Adobe Acrobat Reader™4.0 版或更高版本

查看通过CAS网站或ChemPort可以链接到的PDF文档需要安装Adobe Acrobat Reader，此阅读器可在http://www.adobe.com 上下载；

Discovery Studio™ ViewerPro 或 ViewerLite：Windows 3.5 或更高；

Accelrys 的 Discovery Studio Viewer 的产品属于可视化工具，可以帮助您查看所得结构的 3D 模型；

DS ViewerPro 可从 Accelrys 公司地址：http://www.accelrys.com/dstudio/ds_viewer/ 获得。

Accelrys公司不再支持DS ViewLite，但可从CAS网站上免费下载：http://my.cas.org ，该网站只提供ViewerLite软件本身，不提供其它任何保证。安装完 ViewerPro 或 ViewerLite 后，请运行一次程序以确保它创建了 Windows 注册表项，以便 SciFinder Scholar 使用其来显示 3D 模型；

启动 SciFinder Scholar

您所在组织的站点管理员有权使用安装信息。请与“站点管理员”协作安装 SciFinder Scholar 2006。正确安装后，即可登录开始检索

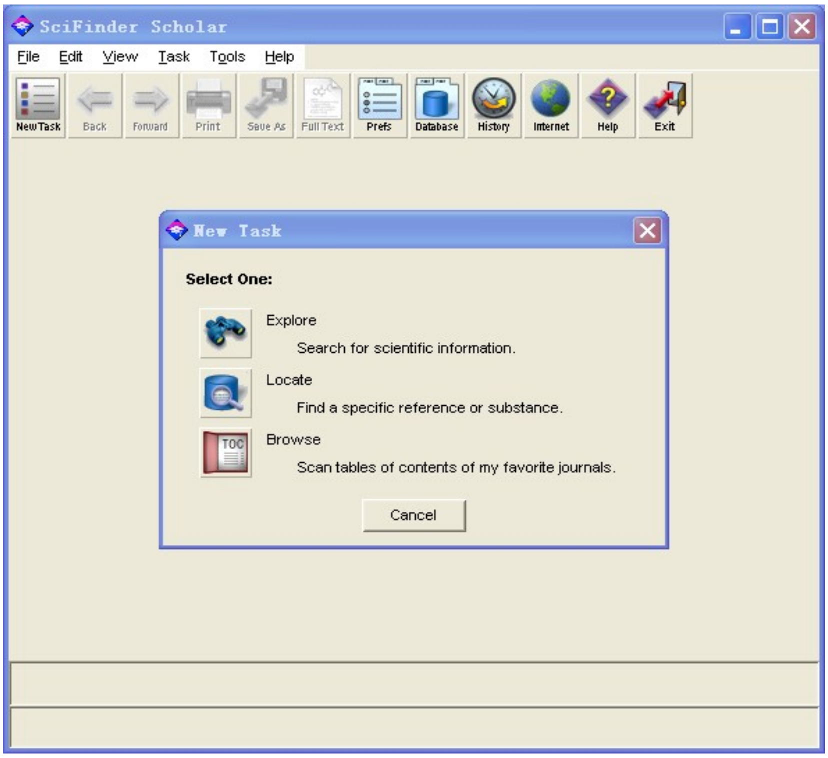
请按以下步骤启动 SciFinder Scholar

1　双击安装过程中所创建的SciFinder Scholar 图标。或者，选择“开始”>“程序”>“SciFinder Scholar”。

　显示 SciFinder Scholar 闪屏后，就会出现许可协议。

2　如果您接受这些条款，请单击“Accept（接受）”开始搜索。

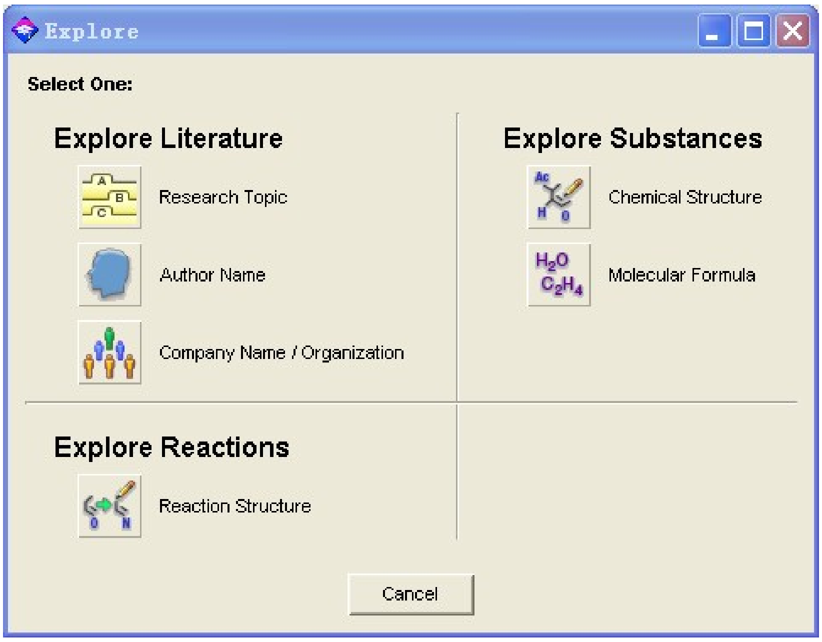
　显示 SciFinder Scholar 主窗口，该窗口包含“主菜单”、“主工具栏”和“新任务”对话框。



3　从“New Task（新任务）”对话框中选择一项。

Explore 检索

通过“Explore（检索）”可以在 CAS 数据库和 MEDLINE 数据库中检索到科学信息。

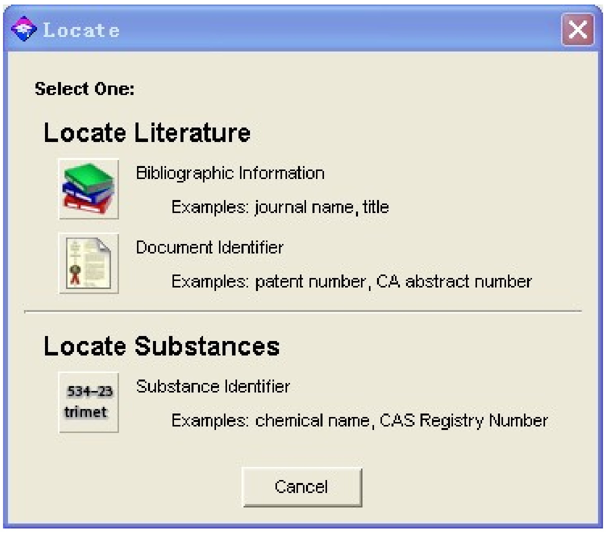


单击执行任务的图标，SciFinder Scholar 会提示您输入进行检索的信息。关于“检索“功能的详细情况，请参阅 SciFinder Scholar 联机帮助。

Locate 定位

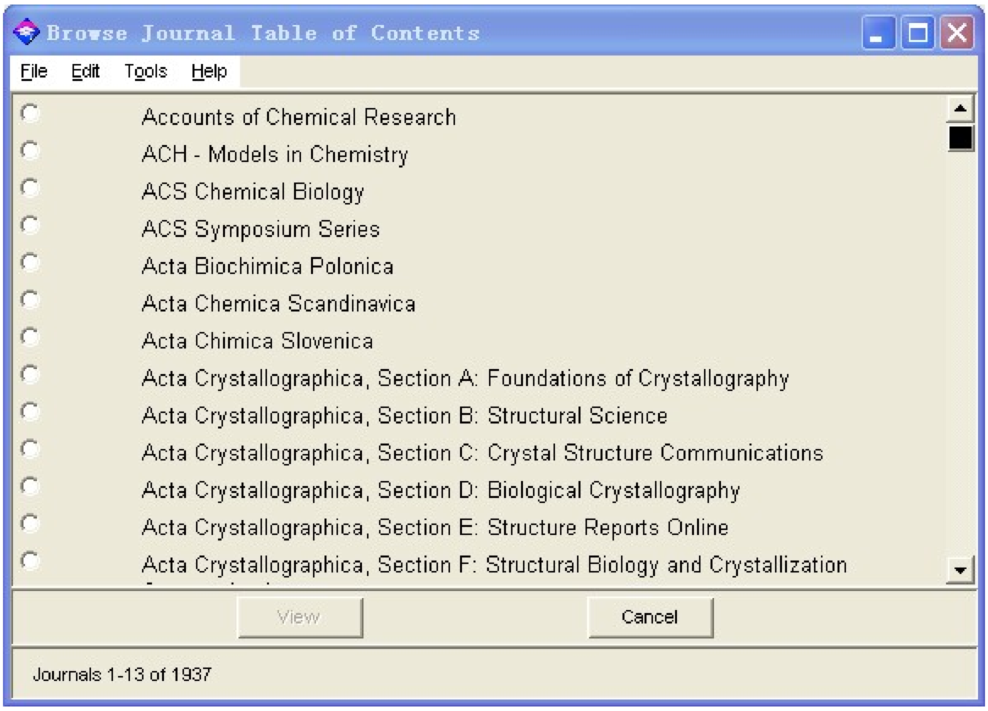
通过“定位”可以快速找到基于一个或多个书目信息或文档标识符的特定参考资料。通过使用名称或 CAS 登记号也可以找到特定的物质。

单击执行任务的图标，SciFinder Scholar 会提示您输入进行检索的相应信息。关于“定位”功能的详细情况，请参阅 SciFinder Scholar 联机帮助。



Browse 浏览

“浏览”允许您浏览 CAS 数据库所囊括的 1900 多种核心科学期刊列表。您可以查看目录，链接至所选期刊的全文选项。



要查看目录，请选择期刊。然后单击“View（查看）”。关于浏览功能的详细情况，请参阅 SciFinder Scholar 的联机帮助。

SciFinder Scholar 帮助和资源

SciFinder Scholar 联机帮助

SciFinder Scholar 提供了全面翔实帮助文件，包括检索技巧、疑难解答信息和“方法”实例链接。

要访问帮助文件，请单击“主工具栏”上的“Help（帮助）”按钮。或者，从“ Help（帮助）”菜单选择“SciFinder Scholar Help（SciFinder Scholar 帮助）”

请按<F1>查看具体“帮助”信息。

SciFinder Scholar 网站

有关SciFinder Scholar详情，请访问www.cas.org/scifiner/schloar.单击“SciFinder Scholar Resources”链接，通过学习简单易学的实例和技巧提高SciFinder Scholar搜索效率。

要快速访问上述内容和其它 SciFinder Scholar 资源，单击“主工具栏”上的“Internet”按钮或从“Tools(工具)”菜单选择“Internet”选项。选择相关资源，然后单击“OK”。

附加支持

如您有任何疑问，或者需要技术帮助，或有关 SciFinder Scholar 的建议，请与站点管理员或 CAS 在中国的代表处 iGroup 公司中国代表处联系。

iGroup 北京办事处
秦亚宜 Zita
Tel:010-82331971 Ext 857
Fax:010-82331961
Email:zita@igroup.com.cn
地址：北京市海淀区知春路 1 号学院国际大厦 1213 室(100083)

iGroup 公司 CAS 部门上海办事处
路峰 Jefferson
Tel:021-64874911
Fax:021-54243058
Email: jefferson@igroup.com.cn
地址：上海市徐汇区宛平南路 521 号恒昌花园 B 座 405（200032）

iGroup 香港办事处
胡惠萍 Windy
Tel:（852）2572 7228
Fax:（852）2575 8822
Email：windy@igroupnet.com
地址：香港湾仔摩理臣山道 5-9A 天乐广场 31 楼 A 室